

Modelo atômico quântico em coleções de química aprovadas no PNLD 2015. Parte II: indeterminação de trajetórias e orbitais

Quantum atomic model in chemistry textbooks approved in PNLD 2015. Part II: indeterminate path and orbitals

Márcio Matos Lima

Universidade Federal da Bahia
marciolimatos@yahoo.com.br

Edvaldo Silva dos Santos

Universidade Federal da Bahia
edquimicaufba@gmail.com

José Luis de Paula Barros Silva

Universidade Federal da Bahia
joseluis@ufba.br

Resumo

Este trabalho tem como objetivo investigar conteúdos relativos ao modelo atômico em coleções de livros didáticos de química para o ensino médio aprovadas pelo PNLD 2015. Especificamente, analisaremos as contribuições dos conceitos de indeterminação das trajetórias dos elétrons e dos orbitais para o modelo atômico. A análise de conteúdo revelou que nem todas as obras tratam desses conceitos e, aquelas que os ensinam, ainda não são suficientemente claras e precisas em relação aos mesmos. A maior parte do texto é informativa, apenas, sem argumentos bem elaborados que possibilitem aos estudantes compreender tais conceitos. Concluímos pela necessidade de maior detalhamento na mediação didática acerca dos conceitos investigados, incorporando seus desenvolvimentos históricos e elaborando a argumentação para aumentar sua significação e contribuição ao ensino do modelo atômico.

Palavras chave: modelo atômico quântico, princípio da incerteza, orbital, livros didáticos de química, ensino de química

Abstract

The aim of this work is to investigate contents concerned to quantum atomic model in chemistry textbooks of secondary school approved by PNLD 2015. We will specifically analyze contributions of the concepts of indetermination of electron trajectory and orbital to atomic model teaching. Content analysis showed that these concepts are not treated in all textbooks and even that teach them are not enough clear and accurate about them. The major part of text is merely informative, without well-elaborated arguments that enable comprehension of such concepts by students. We conclude by need of more details in didactic mediation about

investigated concepts, comprising their historical development and elaborating argumentation to enhance their signification and contribution to atomic model teaching.

Key words: quantum atomic model, uncertainty principle, orbital, chemistry textbooks, chemistry teaching

Introdução

A formação de professores de química requer o aprendizado de conteúdos atualizados, sem os quais, o futuro professor ficará impossibilitado de acompanhar os desenvolvimentos da ciência que ensina. Entre estes, encontra-se o modelo atômico quântico da matéria, ou modelo atômico de orbitais, que é dos mais utilizados pela química que se pratica no século XXI (BUENO; OLIVEIRA, 2015), sendo, por isso, indispensável à formação do professor de química.

O modelo atômico quântico faz parte do que Saviani (2005) denominou de conhecimentos clássicos, aqueles que resistiram ao tempo e se tornaram fundamentais para a compreensão do estágio atual da cultura.

Entendemos, também, que o modelo atômico quântico deve ser estudado no ensino médio, conforme as Orientações Curriculares para o Ensino Médio (CIÊNCIAS..., 2006) e, para que os estudantes tenham conhecimentos atuais e possam compreender temas científicos correlatos veiculados na mídia e participar de debates sobre ciência e tecnologia onde tal modelo desempenhe papel relevante (SANTOS, 2007).

Este trabalho tem por objetivo investigar conteúdos relativos ao modelo atômico em livros didáticos de química para o ensino médio aprovados pelo PNLD 2015. De modo específico, serão analisadas as contribuições da indeterminação das trajetórias dos elétrons e dos orbitais para o modelo atômico.

Os livros didáticos aprovados no PNLD são os materiais didáticos de mais fácil acesso ao estudante do ensino médio: a partir de 2007, o Ministério da Educação distribuiu livros didáticos de química (entre outros) para todas as escolas públicas brasileiras de ensino médio, através do Programa Nacional do Livro Didático, conhecido como PNLD. Por isso, será considerado como o representante dos conteúdos de química ensinados no ensino médio.

Referencial teórico

Temos como pressuposto que o ensino do modelo atômico quântico de orbitais passa pelo ensino de: (a) quantum de uma grandeza; (b) natureza dual da matéria e da radiação; (c) átomo como estrutura; (d) movimento eletrônico sem trajetórias definidas; (e) orbital atômico. A seguir, faremos uma apresentação sucinta dos dois últimos conceitos, como referencial teórico para a análise dos livros didáticos neste trabalho.

Movimento eletrônico sem trajetórias definidas

O princípio da incerteza foi proposto por Werner Heisenberg, em 1927 (HEISENBERG, 1983), e é considerado como um dos conceitos básicos da teoria quântica. Tomado numa perspectiva realista (PESSOA Jr, 2003), indica a impossibilidade de se conhecer as trajetórias dos entes quânticos, tais como elétrons, átomos e moléculas. Também conhecido como princípio da indeterminação, pode ser expresso do seguinte modo:

É impossível determinar com precisão a posição (x) e o momento (p_x) de um objeto quântico, ao mesmo tempo. [...] em laboratório, ao se elaborar uma experiência com finalidade de determinar com clareza a posição, a medição do momento (ou da velocidade) fica bastante incerta. Quando se tenta, ao contrário, medir-se rigorosamente o momento (ou velocidade), a posição se torna bastante imprecisa.

Em suma, as relações de Heisenberg indicam que o produto das incertezas na posição Δx e no momento Δp_x num dado instante satisfaz à desigualdade: $\Delta p_x \Delta x \geq \hbar/2$ (1) (EISBERG; RESNICK, 1979, p.98).

O símbolo \hbar refere-se a $h/2\pi$, onde h é a constante de Planck.

Em outras palavras, o princípio da incerteza afirma ser impossível determinar a posição e o momento de um ente quântico simultaneamente e com qualquer precisão: se a incerteza na medida do momento é reduzida ao mínimo ($\Delta p \rightarrow 0$), a incerteza na medida da posição tende ao máximo ($\Delta x \rightarrow \infty$) e vice-versa. Quanto menor a incerteza na medida de uma das variáveis (x ou p), maior a incerteza na medida da outra variável.

Ora, para se conhecer a trajetória ou órbita de um elétron em volta do núcleo atômico, é necessário determinar a velocidade e a posição com precisão. O princípio da incerteza estabelece que isso não é possível. Logo, considerando que os elétrons se encontram ligados ao núcleo do átomo, é possível apenas afirmar que se encontram em permanente movimento em uma região em volta do núcleo.

Para Heisenberg (1949, p.15) o “uso das palavras ‘posição’ e ‘velocidade’ com exatidão [accuracy] maior que a estabelecida pela equação I [$\Delta p_x \Delta x \geq \hbar/2$] é tão sem significado quanto o uso de palavras cujo sentido não é definido”. De modo mais forte, Heisenberg entendia que a clareza de termos tais como “posição” ou “velocidade” estava vinculada à especificação dos modos pelos quais poderiam ser medidos seus valores, caso contrário, tais termos não teriam significado (HEISENBERG, 1983).

Divergimos de tal concepção. Entendemos que os entes quânticos, tais como, os elétrons, núcleos, átomos, moléculas, entre outros, possuem posição e momento (e velocidade) definidos a cada instante, embora não sejam conhecidos simultaneamente, pois os métodos que se pode empregar nas medidas provocam distúrbios nos seus valores, conforme dado pelo princípio da incerteza.

Em vista do exposto, o princípio da incerteza é indispensável ao estudo do modelo atômico quântico da matéria, pois implica na indeterminação de trajetórias dos elétrons em volta dos núcleos atômicos e contribui para a passagem ao modelo dos orbitais, através da introdução da noção de região onde se encontram os elétrons em volta do núcleo atômico.

Orbital atômico

O conceito de orbital empregado contemporaneamente em pesquisa e no ensino de química deriva da resolução da equação de Schrödinger para átomos hidrogenóides, que possuem apenas um elétron. Subjacente à equação de Schrödinger está a noção de que um ente quântico pode apresentar comportamento ondulatório. Decorre daí a interpretação das soluções dessa equação, que são funções de onda, como representantes dos estados do elétron em átomos hidrogenóides, aos quais correspondem valores de energia determinados.

Uma função de onda de um elétron num átomo hidrogenóides pode ser escrita, em coordenadas polares esféricas, como um produto de três equações independentes, cada qual envolvendo

apenas uma única variável, ou seja: $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r).\Theta(\theta).\Phi(\varphi)$. Em vários estados $\Phi(\varphi)$ é uma função imaginária, produzindo uma função $\psi(r,\theta,\varphi)$ complexa.

Dada a impossibilidade de se representar graficamente uma função de três variáveis, é comum representar a parte radial, $R(r)$, separada da parte angular, $Y(\theta,\varphi) = \Theta(\theta).\Phi(\varphi)$, que recebe a denominação de esférico harmônico.

O termo orbital foi introduzido por Robert S. Mulliken (1932, p. 50) como um modo abreviado para se referir a “função de onda orbital para um elétron”. Esta concepção permanece nos artigos científicos, textos técnicos e muitos textos didáticos.

Por outro lado, em 1926, Max Born havia elaborado a interpretação de $|\psi(r,\theta,\varphi)|^2$ como a densidade de probabilidade de encontrar o ente representado em um volume infinitesimal do espaço (BORN, 1969).

Ora, os gráficos de $|Y(\theta,\varphi)|^2$ produzem figuras geométricas que se prestam a interpretações realistas. As expressões gráficas de $|\psi(r,\theta,\varphi)|^2$, interpretadas como densidades de probabilidade de encontrar o elétron na região em volta do núcleo atômico, produziram outro significado para o termo orbital na química. Tais gráficos, entendidos como delimitações de regiões do espaço onde é possível encontrar o elétron em torno do núcleo em dado estado, sugerem direções para o movimento eletrônico, que podem servir na discussão da formação de ligações químicas por superposição dessas regiões. Tal interpretação casa com proposições químicas de que uma ligação química é realizada por partilha de elétrons entre átomos próximos (PAULING, 1945). Passou-se, então, a denominar os gráficos de $|Y(\theta,\varphi)|^2$ de orbitais.

A extensão dessas ideias para todos os tipos de átomo fez com que o termo orbital assumisse o significado de região do espaço onde há probabilidade de se encontrar os elétrons em um átomo qualquer. Em geral, adota-se o valor de 90-95% de probabilidade como um limite arbitrário da região. Desse modo, criou-se um instrumento que tem sido usado pelos químicos, há quase cem anos, na pesquisa e no ensino.

É precisamente a estrutura geométrica do orbital atômico que na química explica a forma como os átomos estão ligados entre si por meio de ligações químicas, resultando em moléculas com uma forma definida, ou estrutura geométrica. Por sua vez, a forma ou a estrutura molecular desempenha um papel central na compreensão de certas propriedades macroscópicas de substâncias, tais como a sua reatividade e suas manifestações em espectroscopia. A grande utilidade teórica do conceito de orbital atômico em química explica o fato de que, em geral, os químicos sejam realistas sobre este conceito, ou seja, atribuindo ao orbital atômico uma existência real. (LABARCA; LOMBARDI, 2010)

No contexto da mecânica quântica, orbital atômico uma função de onda de um elétron, uma expressão que não tem um referente ontológico direto, na química, orbital atômico é uma região do espaço onde é mais provável encontrar o elétron em torno do núcleo.

Metodologia

A análise dos livros didáticos foi realizada em duas etapas: em primeiro lugar, foi realizada uma análise de conteúdo dos livros (BARDIN, 2004), através de palavras-chave — modelo atômico; átomo; trajetória; órbitas; princípio da incerteza, incerteza; orbitais; modelo de orbitais — visando localizar os trechos referentes à trajetória dos elétrons no interior do átomo e aos orbitais.

Em seguida, foi realizada a leitura dos trechos selecionados para verificar como os conceitos de trajetória dos elétrons e orbitais são apresentados. Esses trechos foram analisados por

comparação com os conceitos constantes do nosso referencial teórico. Analisou-se, ainda, a passagem do modelo atômico de Bohr para o modelo atômico de orbitais.

Para efeito de identificação, as coleções analisadas foram numeradas: Coleção 1 (SANTOS; MÓL, 2013); Coleção 2 (MORTIMER; MACHADO, 2013); Coleção 3 (FONSECA, 2013); Coleção 4 (ANTUNES, 2013).

Resultados e discussão

COLEÇÃO 1 (SANTOS; MÓL, 2013)

Esta coleção trata do modelo atômico quântico no volume 1, de modo breve e superficial e no volume 3, de modo mais aprofundado. No volume 1, após a discussão do modelo atômico de Bohr, é citada sua limitação e informado que a representação desse modelo “não corresponde à realidade, pois os estudos quânticos indicam que os elétrons não giram em órbitas”. Informa, ainda, que “os cálculos quânticos desenvolvidos segundo o modelo mais avançado possibilitam descrever a região do espaço onde se pode encontrar o elétron” e, embora não seja possível a “determinação precisa da posição exata do elétron na estrutura atômica”. Em seguida, informa que essa “região em que se encontra o elétron é denominada orbital” (Ibidem, V. 1, p. 172, passim).

Nota-se que o texto é, basicamente, informativo, faltando argumento que convença os estudantes da plausibilidade das informações. Afirmar que o “atual modelo quântico recorre a cálculos matemáticos bastante avançados que não podem ser demonstrados com base no argumento de autoridade, a nosso ver, insuficiente para convencer os leitores pois não esclarece o raciocínio que deu origem aos novos conceitos.

Encontram-se, no espaço de três linhas da mesma página (Ibidem, V. 1, p. 172) duas definições de orbital: “região em que se encontra o elétron” e “região no espaço em que há maior probabilidade de encontrarmos o elétron”. A falta dos necessários esclarecimentos pode criar dificuldades para o entendimento dos estudantes.

No volume 3, as informações sobre as limitações do modelo de Bohr e os desenvolvimentos subsequentes são mais detalhadas. Em seguida, é introduzido o conceito de natureza dual da matéria: para toda partícula, “o caráter ondulatório estaria representado pelo comprimento de onda λ e o caráter corpuscular, pela quantidade de movimento $m.v$ ”, relacionados pela equação $\lambda = h/m.v$ (Ibidem, V. 3, p. 297). Na seção seguinte, “O Princípio da Incerteza”, considera-se que “aceitar o comportamento dual é admitir que não existe mais essa certeza” qual seja: de poder determinar velocidade e localização de um corpo (Ibidem, V. 3, p. 298). E conclui: “Em síntese, o [...] Princípio da Incerteza considera que é impossível determinar ao mesmo tempo a velocidade e a posição exata de um elétron. Essa impossibilidade está relacionada à interação do instrumento de medida e o objeto sob investigação” (Ibidem, V. 3, p. 2978).

Na legenda da foto de Heisenberg, afirma-se que este postulou que “não é possível determinar simultaneamente a posição e o *momentum* de uma partícula atômica” (Ibidem, V. 3, p. 298). Esta segunda definição peca pelo fato das relações de incerteza não serem postuladas, mas, dedutíveis e por não estar conectada claramente com a definição apresentada no texto, nem conectada com a equação de de Broglie, citadas acima.

Na sequência, os autores apresentam a função de onda como relacionada à “natureza ondulatória do elétron” e que, Max Born interpretou-a como um meio de “descrever a probabilidade de encontrarmos um elétron em uma dada região do espaço” (Ibidem, V. 3, p. 298, passim). Mais adiante informa que “cada uma dessas funções [de onda] está associada a

uma distribuição espacial da probabilidade de localização do elétron. Esta região de alta probabilidade (superior a 90%) de se encontrar o elétron foi denominada orbital atômico” (Ibidem, V. 3, p. 299). A legenda da figura apresentada junto a este texto e reproduzida abaixo, diz que “O modelo atômico de Schrödinger sugere que não é possível determinar a trajetória do elétron em torno do núcleo; o que se pode determinar é uma certa energia e, com isso, obter uma região onde é mais provável encontrar o elétron” (Ibidem, V. 3, p. 299).

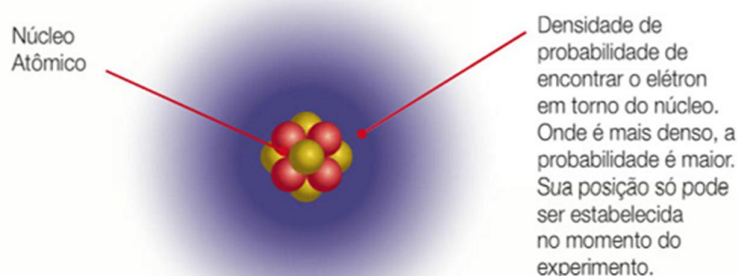


Figura 1: modelo atômico de Schrödinger (SANTOS; MÓL, 2013, V.3, p. 299)

Em suma: a Coleção 1 comenta o princípio da incerteza em relação com a indeterminação da trajetória dos elétrons no átomo, embora de modo não muito claro e sem suficiente explicação de como a interação do instrumento com o elétron produz tal indeterminação. Assim, a passagem dos modelos de trajetórias definidas — modelo de Bohr e Sommerfeld — para o modelo de orbitais faz sentido. Entretanto, não é muito clara relação entre função de onda, orbital e probabilidade de encontrar o elétron.

COLEÇÃO 2 (MORTIMER; MACHADO, 2015)

Esta coleção trata do modelo atômico quântico no volume 1, no texto 13, intitulado “O modelo atual - comportamento dual do elétron, incerteza e orbital”. Partindo de afirmativas sucintas acerca da validade do modelo atômico de Bohr, comenta-se sobre um novo modelo atômico e sobre as limitações e ineficiência da mecânica clássica para explicá-lo. Segue-se uma introdução ao comportamento dual da luz e do elétron, que possibilitou a utilização da mecânica ondulatória para os elétrons e levou Schrödinger a propor uma equação de onda para o elétron, resultando no modelo atômico atual.

Em seguida, informa-se sobre a criação da mecânica quântica na década de 1920 e que o modelo atômico resultante dessa teoria “iria abandonar as ideias de órbita e, por conseguinte, de trajetória para descrever o comportamento dos elétrons” (Ibidem, p. 196). O texto não estabelece relação entre mecânica quântica e mecânica ondulatória, bem como, não explica as razões para o abandono das trajetórias dos elétrons.

Mais adiante, é afirmado que “a natureza dual das partículas subatômicas resulta em uma incerteza nunca antes imaginada [...] inerente à escala dos fenômenos quânticos. A formulação dessa incerteza se tornou um princípio, que ficou conhecida como o Princípio de Incerteza de Heisenberg” (Ibidem, p. 198). Além da inconsistência da expressão “natureza dual das partículas” — se o comportamento é de partícula, não se pode dizer que seja dual — falta explicação acerca do que consiste tal incerteza.

Orbital é “definido como a região mais provável de encontrar um elétron a certa distância do núcleo”. Tal definição resulta, segundo os autores, da interpretação do quadrado da função de onda “que descrevia o comportamento das partículas” como “a probabilidade de encontrar o elétron numa região da eletrosfera”. A seguir, o texto traz uma ilustração da “representação do orbital 1s para o átomo de hidrogênio” (Ibidem, p. 197, passim).

No parágrafo final do Texto 13, os autores comentam sobre a matemática avançada utilizada pela mecânica quântica e justifica assim a falta de detalhes sobre as características do modelo atômico atual e informando que “Vez por outra poderemos lançar mão da ideia de orbital, mas apenas para descrever uma região do espaço correspondente à maior probabilidade de se encontrar o elétron” (Ibidem, p. 199).

No nosso entender, informar é insuficiente: é preciso expor as razões para os conceitos apresentados, elaborando argumentos que possibilitem aos estudantes compreendê-los. Nesse sentido, a coleção 2 deixa muito a desejar.

COLEÇÃO 3 (FONSECA, 2013)

Fonseca (2013) não trata dos conceitos de indeterminação de trajetórias, incerteza de medidas ou orbitais no seu texto. Contudo, se limitando aos modelos de Bohr e Sommerfeld. Contudo, há um trecho às páginas 184-185 em que a autora trata da “Estrutura atômica básica”, onde é apresentada uma ilustração com um núcleo bem definido e uma eletrosfera com limites difusos, definida como: “uma região imensa em relação ao núcleo e de densidade muito baixa (rarefeita); isso significa que a maior parte do átomo é um grande vazio” (Ibidem, p. 185). Tal ilustração lembra a Figura 1, acima, embora sem utilização dos mesmos conceitos. Não se sabe qual a intenção da autora, dada a flagrante incoerência com as órbitas eletrônicas apresentadas nos modelos citados. O certo é que esta incoerência pode causar insegurança nos estudantes que estudem por este livro didático.

COLEÇÃO 4 (ANTUNES, 2013)

Esta coleção também não trata dos conceitos sob estudo neste artigo. Os estudantes que utilizam tal material didático perdem a oportunidade de discutir tópicos mais avançados e atuais da química.

Consideração finais

Os resultados mostram que o ensino dos conceitos de indeterminação de trajetória dos entes quânticos e de orbital, nas coleções de livros didáticos aprovadas no PNLD 2015, é insuficiente, por falta de argumentação. A transição do modelo atômico de Bohr para o modelo atômico quântico não é bem justificada, o que dificulta a compreensão por parte dos estudantes.

Duas das coleções sequer tratam desses conceitos. Embora tal escolha não seja objeto de avaliação por parte do PNLD, entendemos que há uma perda substantiva de conteúdo, pois o modelo atômico quântico possibilita a discussão da limitação do conhecimento humano, do realismo, das dificuldades de conceituação de referentes não diretamente sensíveis.

O modelo atômico quântico poderá contribuir para “evitar visões distorcidas sobre o fazer científico; permitir uma compreensão mais refinada dos diversos aspectos envolvendo o processo de ensino-aprendizagem da ciência; proporcionar uma intervenção mais qualificada em sala de aula” (MARTINS, 2007), proporcionando maior inserção da história e da filosofia da ciência no ensino de química. A discussão de aspectos históricos e epistemológicos também

poderá possibilitar melhoria da argumentação e detalhamento no trabalho de transposição didática desses conceitos investigados, esclarecendo seus significados.

Para tanto, advogamos a articulação entre os ensinamentos de química e física no sentido de definir os conteúdos e os modos de ensinar o modelo atômico quântico, bem como, modelos em geral.

Referências

- ANTUNES, Murilo Tissoni (ed.). **Ser protagonista: química**. 2. ed. São Paulo: SM, 2013. V. 1.
- BARDIN, Laurence. **Análise de conteúdo**. 3. ed. Lisboa: Edições 70, 2004.
- BORN, MAX. **Atomic Physics**. 8. ed. London: Blackie & Son, 1969.
- BUENO, Mauro A.; OLIVEIRA, Boaz G. A influência da ligação de hidrogênio em reações químicas: reação de Prileschajew. **Química Nova**. V. 38, n. 1, 2015, p. 1-7.
- CIÊNCIAS da natureza matemática e suas tecnologias. Brasília: MEC/SEB, 2006. (Orientações curriculares para o ensino médio; volume 2.)
- EISBERG, Robert; RESNICK, Robert. **Física Quântica**. Rio de Janeiro: Elsevier, 1979.
- FONSECA, Martha Reis Marques. **Química**. São Paulo: Ática, 2013. V. 1.
- HEISENBERG, Werner. The physical content of quantum kinematics and mechanics. In: WHEELER, John Archibald; ZUREK, Wojciech Hubert. **Quantum theory and measurement**. Princeton: Princeton University Press, 1983. p. 62-84.
- HEISENBERG, Werner. **The physical principles of the quantum theory**. Mineola: Dover, 1949.
- LABARCA, M e LOMBARDI, O. Acerca del status ontológico de las entidades químicas: el caso de los orbitales atómicos. **Principia**. V. 14, n. 3, 2010, p. 309–333.
- MARTINS, A. F. P. História e Filosofia da Ciência no Ensino: há muitas pedras nesse caminho... **Caderno Brasileiro de Ensino de Física**. v. 24, n. 1, p. 112-131, 2007.
- MORTIMER, Eduardo Fleury; MACHADO, Andréa Horta. **Química**. 2. ed. São Paulo: Scipione, 2013. V. 1.
- MULLIKEN, Robert S. Electronic structures of polyatomic molecules and valence. II. General considerations. **Physical Review**, V. 41, n. 1, 1932, p. 49-71.
- PESSOA Jr, Osvaldo. **Conceitos de física quântica**. São Paulo: Livraria da Física, 2003.
- PAULING, Linus. **The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals**. 2. ed. Ithaca: Cornell University Press, 1945.
- SANTOS, Wildson Luiz Pereira. Educação científica na perspectiva de letramento como prática social: funções, princípios e desafios. **Revista Brasileira de Educação**. V. 12 n. 36, set./dez. 2007, p. 474-550.
- SANTOS, Wildson Luiz Pereira; MÓL, Gerson de Souza (coord.) **Química cidadã**. 2. ed. São Paulo: AJS, 2013. V. 1, V. 3.